



PSE Molekulardynamik

- Entwicklung eines MD-Simulators

27. Oktober, 2010

Dipl.-Inf. Wolfgang Eckhardt, eckhardw@in.tum.de

Dipl.-Inf. Thomas Auckenthaler, auckenth@in.tum.de

Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz, bungartz@in.tum.de

Organisatorisches

- "Große" Treffen (regelmäßig alle 2 Wochen)
 - Vorstellung der Ergebnisse (+ Fragen)
 - Theorie zum neuen Übungsblatt
- "Kleine" Treffen
 - Individuelle Treffen mit Betreuer
 - Zur Klärung von Problemen
- Abgabe der Lösungen
 - per E-mail bis zur angegebenen Deadline
 - Enthält: Vollständiger Sourcecode mit Makefile
 - Vollständige Doxygen – Dokumentation
 - Funktionierende Tests
- 10 Punkte pro Blatt, Benotung u.a. anhand der erreichten Punkte

Übungsblätter

- Übungsblatt 1:
 - Vertraut machen mit der gesamten Entwicklungsumgebung und Simulation
- Übungsblatt 2:
 - Kollision zweier Körper
 - CppUnit, Log4CXX
- Übungsblatt 3:
 - XML
 - LinkedCell-Algorithmus, Randbedingungen
- Übungsblatt 4:
 - Thermostat: Kristallisation von Argon; Konvektionsströmungen
 - Leistungsmessung, evtl. SSE/Vektorisierung
- Übungsblatt 5:
 - Shared-Memory Parallelisierung mit OpenMP
 - Rayleigh-Taylor Instabilität

References

- Molekulardynamik:
 - Griebel, Knapek, Zumbusch: **Numerische Simulation in der Molekulardynamik; Springer 2003**
 - Griebel, Knapek, Zumbusch: Numerical Simulation in Molecular Dynamics. Springer, 2007
 - D. Frenkel and B. Smit: Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Applications. Academic Press, 2002.
 - D. Rapaport. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press, 1995.

References

■ C++-Programmierung:

- Steve Qualline: Practical C++ Programming. O'Reilly, 2003
- Scott Meyers: Effective C++. Addison-Wesley, 2007
- Scott Meyers: More Effective C++. Addison-Wesley, 2007
- Online-Referenzen:
 - www.cppreference.com
 - <http://www.cplusplus.com/>
(Tutorials/Referenz/Forum)

■ Weiter:

- Scott Meyers: Effective STL
- Fowler: Refactoring - Improving the Design of Existing Code. Addison-Wesley, 1999
- Gamma, Helm, Johnson, Vlissides: Design Patterns – Elements of Reusable Object-Oriented Software. Addison-Wesley, 1994



Fragen?